

# ОБ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛЕ КРЕМНИЯ

В. В. Сыщенко\*, А. И. Тарновский, В. И. Дроник

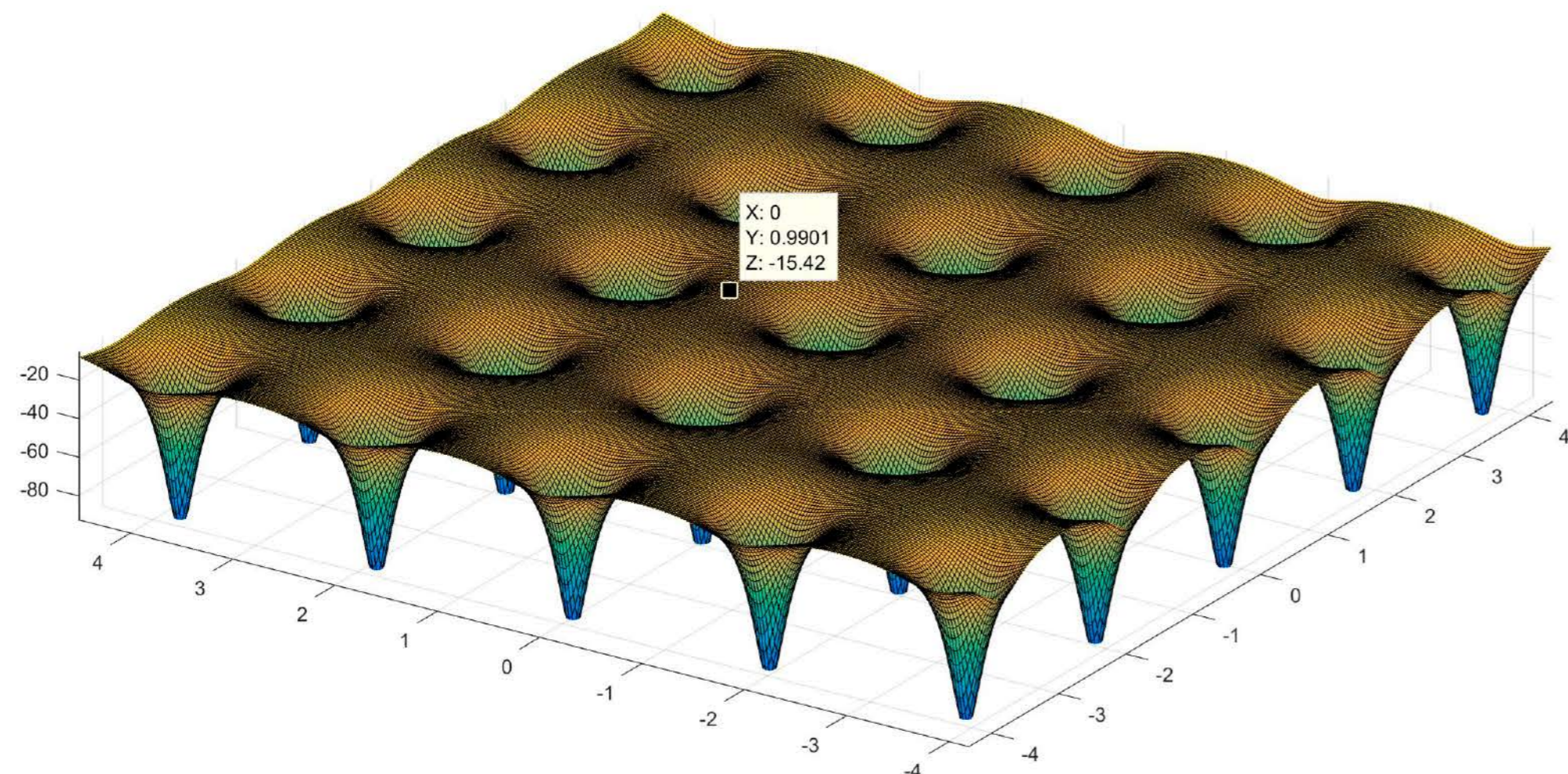
Белгородский государственный национальный исследовательский университет, 308015 Белгород, Россия

\*E-mail: syshch@yandex.ru

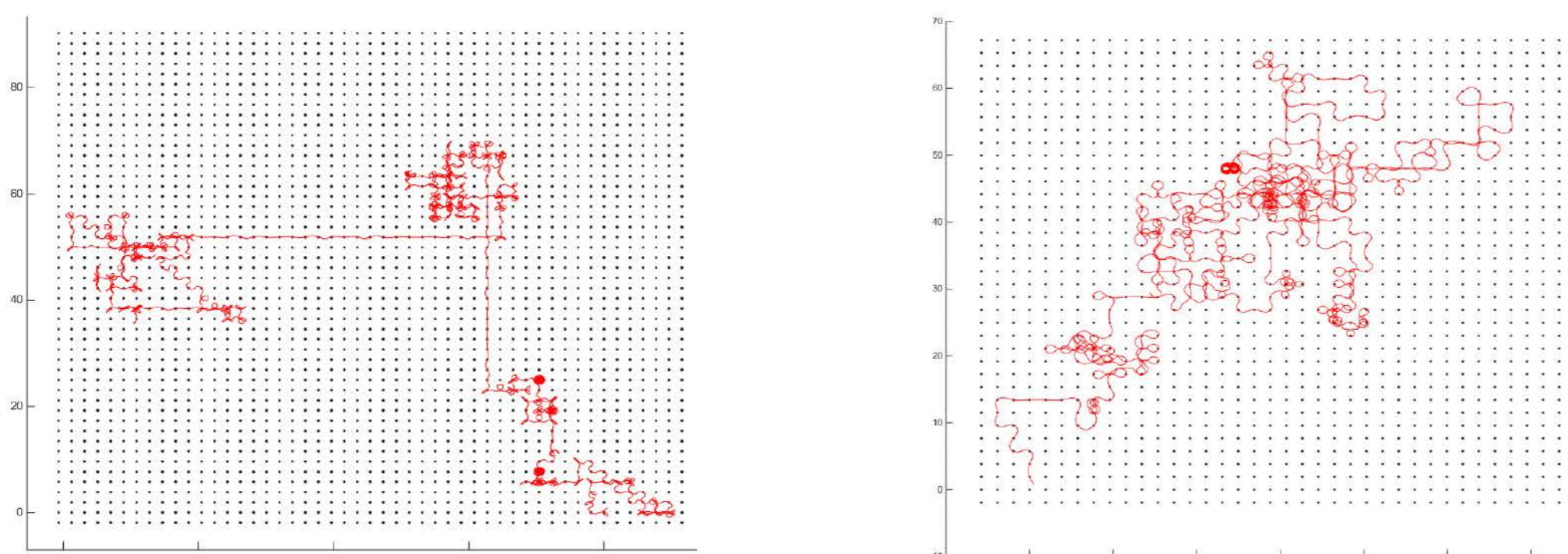
Аномальной диффузией называют случайный процесс, при котором среднее значение квадрата смещения частицы от точки старта зависит от времени нелинейным образом:  $\langle r(t)^2 \rangle \sim t^m$ , где  $m$  отлично от единицы [1] (для нормальной диффузии, или броуновского движения показатель степени равен единице). В [2] было обнаружено, что такое поведение возможно для частиц высоких энергий, движущихся в кристалле в условиях, близких к условиям аксиального каналирования. В этом случае быстрое ( $m > 1$ ) смещение частицы в поперечной атомным цепочкам плоскости обусловлено временным захватом частиц в плоскостные каналы.

В настоящем докладе путем численного моделирования найдена величина показателя  $m$  для различных значений энергии поперечного движения электронов в плоскости (100) кристалла кремния. Установлено, что не во всех случаях поведение системы согласуется с результатами [2].

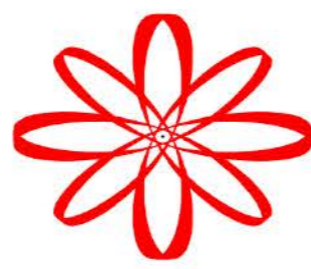
1. Metzler R., Klafter J. // Phys. Reports. 2000. V. 339. P. 1.
2. Greenenko A.A., Chechkin A.V., Shul'ga N.F. // Phys. Lett. A. 2004. V. 324. P. 82.



Потенциальный рельеф, в котором происходит поперечное движение электрона, проходящего сквозь кристалл кремния под малым углом к оси [100].



Примеры траекторий электрона с энергией 10 ГэВ по результатам моделирования. В основе аномальной диффузии лежит возможность временного захвата электрона в плоскостной канал, приводящего к быстрому и значительному удалению от точки старта (так называемые полеты Леви, Lévi flights).



## Что такое нормальная и аномальная диффузия?

Нормальная диффузия (броуновское движение) описывается уравнением диффузии

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, t) = a \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) f(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

где  $a$  – коэффициент диффузии, а двумерный случай с  $\mathbf{r} = (x, y)$  как раз соответствует рассматриваемому нами движению частиц в поперечной к атомным цепочкам кристалла плоскости. Его решение с начальным распределением диффундирующих частиц в виде  $\delta$ -функции,

$$f(\mathbf{r}, 0) = \delta(x)\delta(y), \quad (2)$$

имеет вид

$$f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi at} \exp\left(-\frac{\mathbf{r}^2}{4at}\right) = \frac{1}{\pi(\mathbf{r}^2)} \exp\left(-\frac{\mathbf{r}^2}{(\mathbf{r}^2)}\right), \quad (3)$$

(см. любой учебник математической физики), то есть среднее значение квадрата смещения частиц от начальной точки зависит от времени линейно:

$$\langle \mathbf{r}(t)^2 \rangle = at. \quad (4)$$

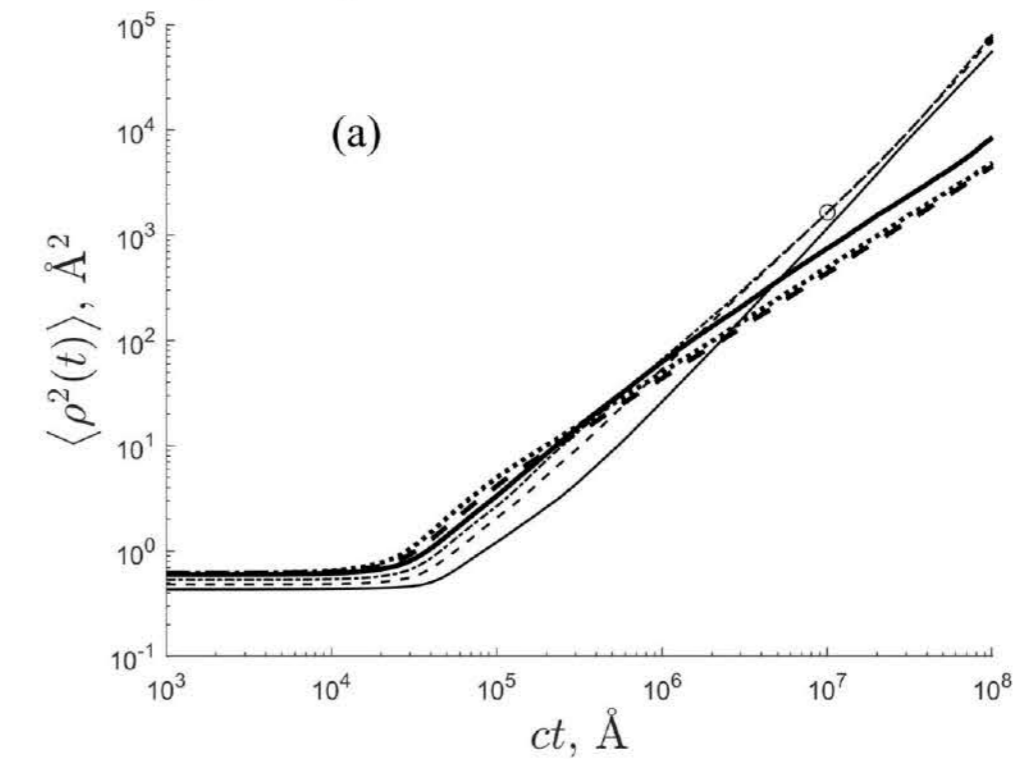
Ситуация же, при которой зависимость этой величины от времени нелинейна,

$$\langle \mathbf{r}(t)^2 \rangle \sim t^\mu, \quad (5)$$

где  $\mu$  отлично от единицы, носит название аномальной диффузии.

Построим в логарифмическом масштабе найденные в результате моделирования зависимости  $\langle \mathbf{r}(t)^2 \rangle$  (на рисунке ниже – результаты для электронов с  $E = 10$  ГэВ и энергиями поперечного движения 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5 и 3 эВ). Угол наклона такой кривой позволяет судить о значении показателя степени  $\mu$  в (5) в зависимости от времени. В первых трех случаях в пределе больших глубин проникновения  $\mu$  заметно превышает единицу, что свидетельствует об аномальном характере диффузии частиц в поперечной плоскости.

В оставшихся трех случаях энергия поперечного движения значительно превышает высоту потенциальных барьеров, поэтому захвата частицы в плоскостные каналы на значительное время не происходит, и показатель  $\mu$  близок к единице, то есть процесс диффузии носит нормальный (броуновский) характер; как показано в [2], такой же характер имеет диффузия в системе случайно расположенных параллельных цепочек.

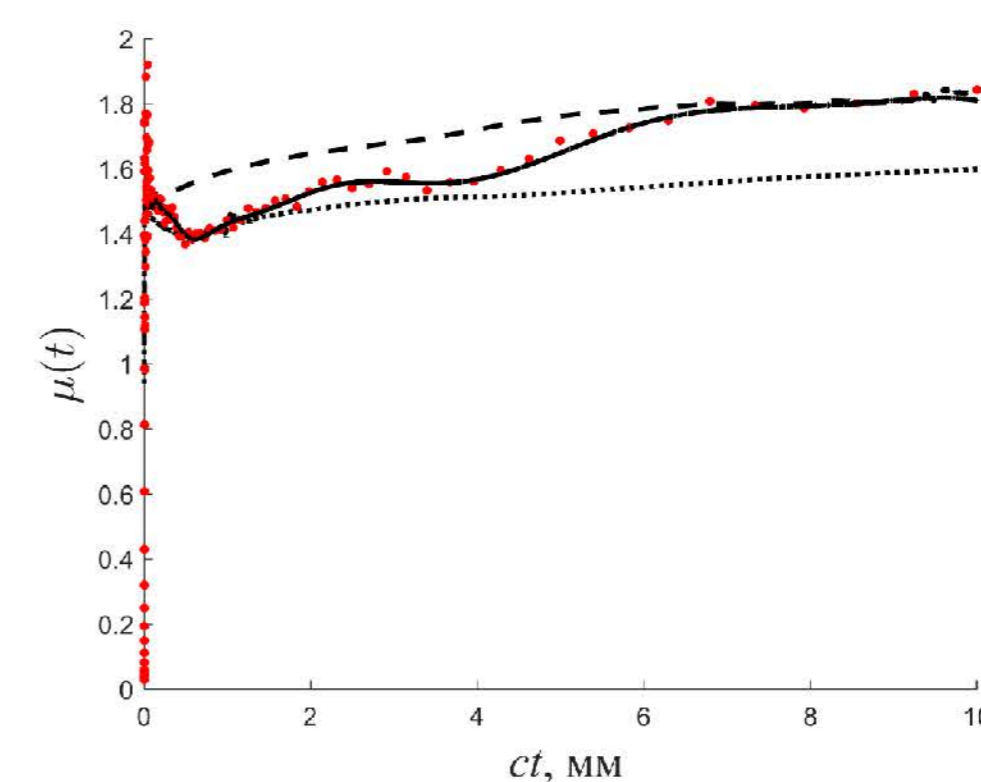


Как извлечь из результатов моделирования показатель степени  $\mu$  ?

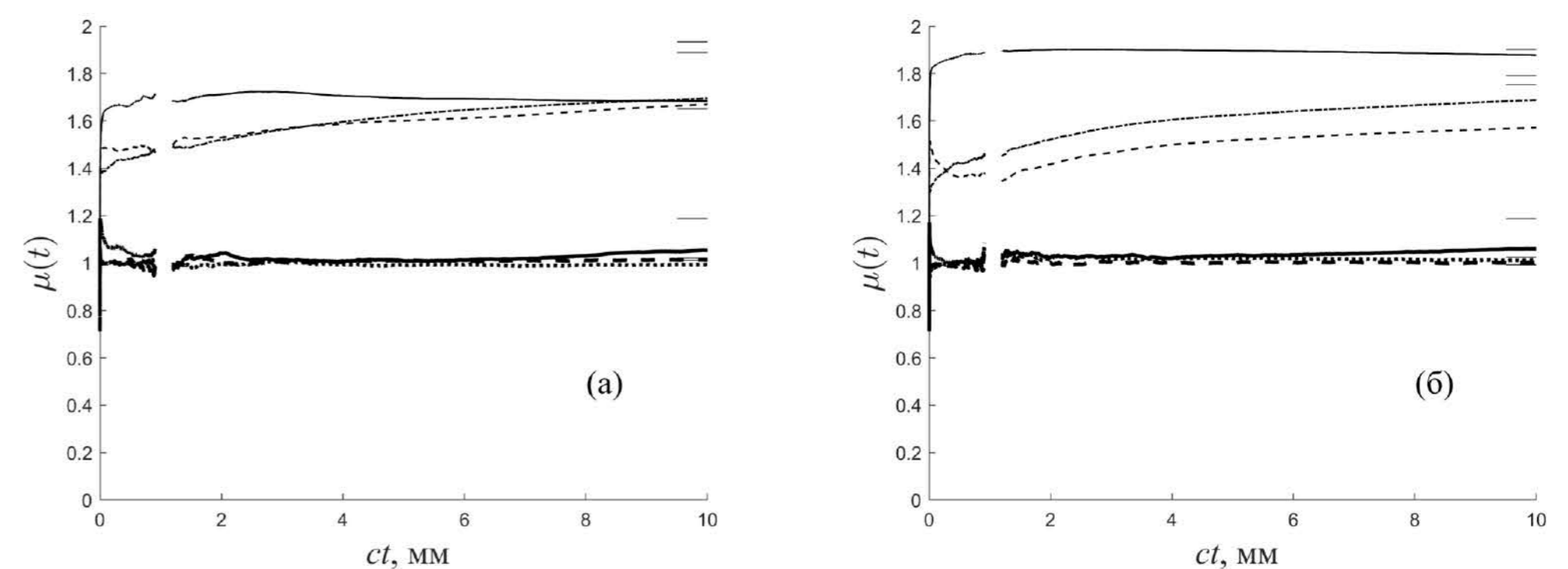
Казалось бы, все просто:

$$\mu(t) = \frac{\ln(\langle \mathbf{r}(t)^2 \rangle / \langle \mathbf{r}(t_0)^2 \rangle)}{\ln(t/t_0)}, \quad (6)$$

где  $t_0$  – некоторый стандартный момент времени,  $t_0 \ll t$ , причем в [2] значение  $t_0$  не конкретизируется. Однако, это формула является точной только в случае независимого от времени показателя  $\mu$ ! В противном случае возникает неоднозначность:



Графики  $\mu(t)$ , полученные по формуле (6) для  $ct_0 = 1$  мм (пунктирная линия) и  $ct_0 = 9.5$  мм (штриховая линия), а также как производная функции, аппроксимирующей логарифмическую кривую на предыдущем рисунке полиномом 25-ой степени (сплошная линия). Точки соответствуют найденным численным значениям наклона касательных к логарифмической кривой для  $E_{\perp} = 1$  эВ на предыдущем рисунке.



Зависимости  $\mu(t)$  для всех исследованных значений  $E_{\perp}$ , рассчитанные по формуле (6) для  $ct_0 = 1$  мм. Короткие горизонтальные линии на правой стороне рисунков соответствуют значениям  $\mu_{end}$  из таблицы:

Показатель диффузии на максимальной глубине проникновения (10 мм), рассчитанный по формуле (6) для  $ct_0 = 1$  мм ( $\mu$ ), а также по наклону касательной к логарифмической кривой, отображающей результаты моделирования ( $\mu_{end}$ ) для двух типов начальных условий. Результаты для случая  $E_{\perp} = 1$  эВ оказываются близки к результату [2]  $\mu \approx 1.51$ .

$E_{\perp}, \text{эВ}$	(a)		(б)	
	$\mu$	$\mu_{end}$	$\mu$	$\mu_{end}$
0.5	1.68	1.65	1.88	1.79
1.0	1.67	1.93	1.57	1.75
1.5	1.70	1.89	1.69	1.90
2.0	1.05	1.19	1.06	1.19
2.5	1.01	1.01	1.00	1.02
3.0	0.99	1.02	1.01	0.99

(а) направление начальной скорости выбиралось для частицы случайным образом, как в [2];

(б) все начальные скорости выбраны в плоскости (110) кристалла кремния.

## Summary:

- Выполнено моделирование движения ансамбля электронов высокой энергии, движущихся в кристалле кремния под малым углом к оси [100] ненамного превышающим критический угол аксиального каналирования.
- В случаях, когда энергия движения электронов в поперечной плоскости ненамного превышает высоту потенциальных барьеров, создаваемых системой атомных цепочек кристалла, результаты моделирования подтверждают наличие аномальной диффузии в поперечной плоскости.
- С увеличением энергии  $E_{\perp}$  электронов характер движения приближается к нормальной (броуновской) диффузии, что обусловлено исчезновением возможности захвата электрона в плоскостные каналы.
- Качественное отличие случаев аномальной и нормальной диффузии хорошо заметно независимо от деталей используемой процедуры анализа результатов.
- Количественная характеристика аномальной диффузии (зависимость степенного показателя от времени), извлекаемая из результатов моделирования, нуждается в уточнении перед использованием в дальнейших приложениях.